界 面 状 態 の 理 論

北大理　小 野 正 利

以前に，堀先生，和田さん，小倉さんと私で界面状態の格子振動を考えました。ここでは，その時の私達が一緒に行った仕事[1)]を紹介致します。

私達の仕事の発端は，Garcia-Moliner と Rubio[2)]（1969）が行った，表面や界面での電子状態の計算方法が，格子系にも適用出来ないかという事でありました。

彼等の得た方法は，界面をはさんで二つの系を考え，一方のGreen fn.を G_A．もう一方のGreen *fn.*を G_B とすると

$$\det(g_A + g_B) = 0 \tag{1}$$

が界面状態を与えるというものです。この結果を出すのに用いた方法は，equivalent pot.（あるいは，pseudopotential）の考え方です。

しかし，この界面状態を求める表式は，簡単に導く事が出来ます。界面 S によって区切られている二つの系があるとして，片方を R そして，もう片方を L とします。すると，次の Schrödinger 方程式が得られます。

$$(H_r - E)\Psi_r(\boldsymbol{r}) = 0 \qquad \text{for} \quad R \tag{2a}$$

$$(H_e - E)\Psi_e(\boldsymbol{r}) = 0 \qquad \text{for} \quad L \tag{2b}$$

界面で，Ψ に対して，非斉次のNeumann条件を課し，また，Green *fn.* に対しては，斉次のNeumann 条件を課す事により，解を導出する事が出来ます。出て来る結果は(1)式と全く同じ形を持ちます。

$$\det|G_r + G_e| = 0 \tag{3}$$

さて，このような関係は，最近接相互作用のみを考えた格子系にも，界面状態を求める式として，導く事が出来ます。今次のような系を考えます。

R－latticeの運動方程式は，次の operator formで書けます。

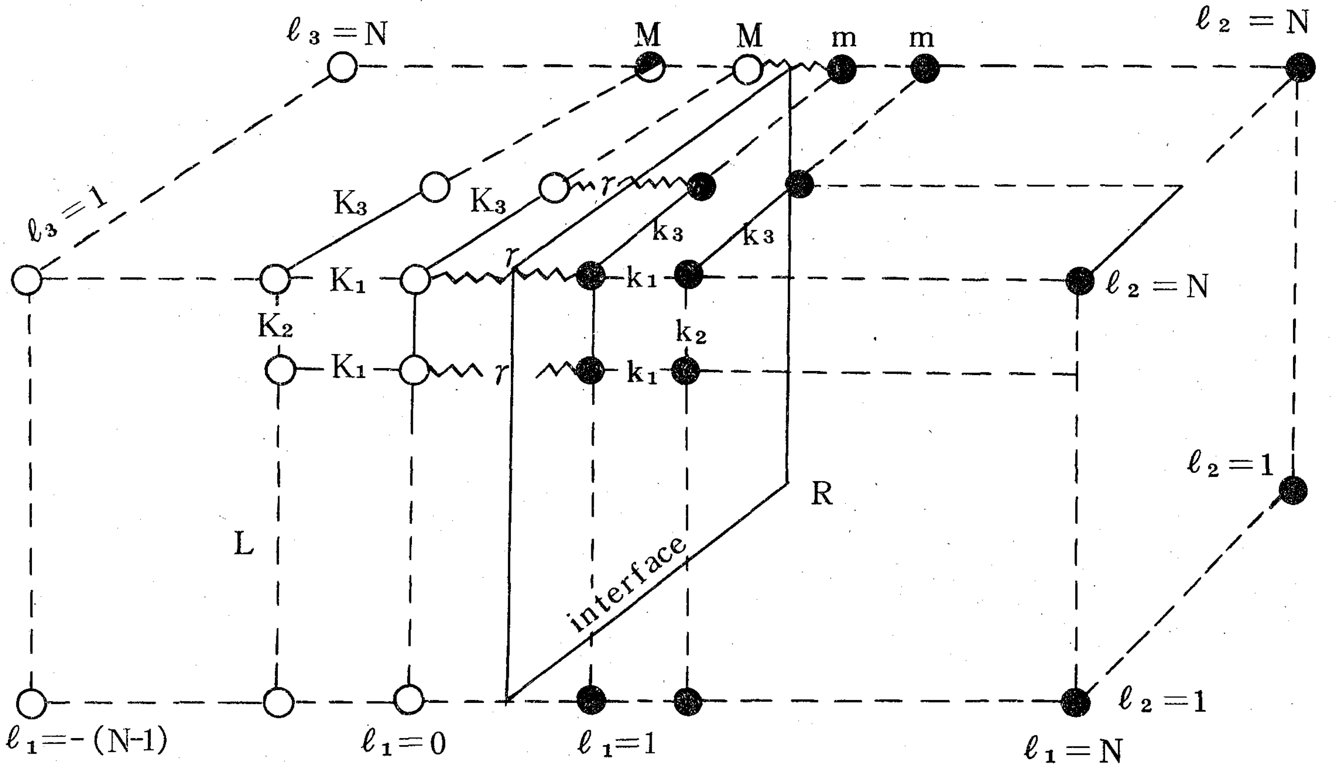


図1

$$(m\omega^2 - L_r)|u> = \triangle L|u> \tag{4}$$

(4)の形式解は,

$$|u> = |u_r^{(0)}> + G_r(\omega^2)\triangle L|u> \tag{5}$$

さて，今

$$C(\ell_1 : \mu\nu) = \sum_{\ell_2,\ell_3} u(\ell_1, \ell_2, \ell_6) Z_{\ell_2}^{(\mu)} Z_{\ell_3}^{(\nu)} \tag{6}$$

$$Z_{\ell}^{(\mu)} \equiv \left(\frac{2-\delta_{\mu,o}}{N}\right)^{1/2} \cos\left\{\left(\ell-\frac{1}{2}\right)\frac{\mu\pi}{N}\right\} \tag{7}$$

を用いますと,

$$\begin{aligned} C(\ell_1 : \mu\nu) &= C_r^{(0)}(\ell_1 : \mu\nu) \\ &\quad + G_r^{\ell_1,1}(\omega^2 : \mu\nu)\, r\,\{C(1:\mu\nu) - C(0:\mu\nu)\} \end{aligned} \tag{8}$$

$$G_r^{\ell_1,1} \equiv \frac{1}{N}\sum_{\lambda=0}^{N-1} \frac{(2-\delta_{\lambda 0})\cos\{(\ell_1-\frac{1}{2})\frac{\lambda\pi}{N}\}\cos\frac{\lambda\pi}{2N}}{m\omega^2-2k_1(1-\cos\frac{\lambda\pi}{N})-2k_2(1-\cos\frac{\mu\pi}{N})-2k_3(1-\cos\frac{\nu\pi}{N})} \tag{9}$$

同様に，L－latticeについても

$$C(\ell_1:\mu\nu)=C_\ell^{(0)}(\ell_1:\mu\nu)+G_\ell^{\ell_1,0}(\omega^2:\mu\nu)\gamma\{C(0:\mu\nu)-C(1:\mu\nu) \tag{10}$$

$$G_\ell^{\ell_1,0} \equiv \frac{1}{N}\sum_{\lambda=0}^{N-1} \frac{(2-\delta_{\lambda 0})\cos\{(\ell_1-\frac{1}{2})\frac{\lambda\pi}{N}\}\cos\frac{\lambda\pi}{2N}}{M\omega^2-2K_1(1-\cos\frac{\lambda\pi}{N})-2K_2(1-\cos\frac{\mu\pi}{N})-2K_3(1-\cos\frac{\nu\pi}{N})} \tag{11}$$

が成り立ちます。(8)式と(10)式の引き算を行いますと，((8)式で $\ell_1=1$，(10)式で $\ell_1=0$ と置く)。

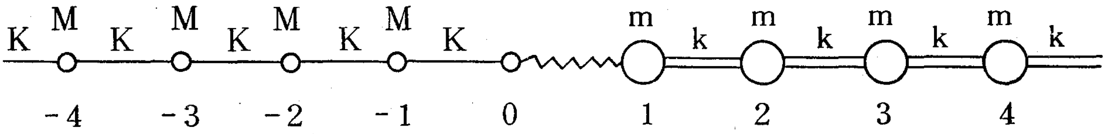
$$\begin{aligned} C(1:\mu\nu)-C(0:\mu\nu) &= C_r^{(0)}(1:\mu\nu)-C_\ell^{(0)}(0:\mu\nu) \\ &+[G_r^{1,1}(\omega^2:\mu\nu)+G_\ell^{0,0}(\omega^2:\mu\nu)]\gamma\{C(1:\mu\nu)-C(0:\mu\nu)\} \end{aligned} \tag{12}$$

が得られます。ここで界面振動を求めているのであるという事を考慮しますと，

$$[G_r^{1,1}(\omega^2:\mu\nu)+G_\ell^{0,0}(\omega^2:\mu\nu)]=\gamma^{-1} \tag{13}$$

が得られ，この式は(3)式と良く似ています。

簡単な場合にこの(13)式を適用してみます。



上図のような一次元系では，$G_r^{1,1}$，$G_\ell^{0,0}$ は次のように求まります。

$$G_r^{1,1}(\omega^2)=\frac{1}{2k}\frac{X_r-\sqrt{X_r(X_r-1)}}{X_r} \tag{14}$$

$$G_\ell^{0,0}(\omega^2)=\frac{1}{2K}\frac{X_\ell-\sqrt{X_\ell(X_\ell-1)}}{X_\ell} \tag{15}$$

$$X_r = \omega^2 / (4k/m)$$
$$X_\ell = \omega^2 / (4K/M) \tag{16}$$

(14) 式と (15) 式とを (13) 式に用いると

$$1 = \frac{r}{2K}\left(\frac{X_\ell - \sqrt{X_\ell(X_\ell - 1)}}{X_\ell}\right) + \frac{r}{2K}\left(\frac{X_r - \sqrt{X_r(X_r - 1)}}{X_r}\right) \tag{17}$$

となり，今 $r = K$ の場合を考えることにしますと，

$$\omega^2 = \frac{1}{mM} \quad \frac{(KM - mk)}{(m - M)(k - K)} \tag{18}$$

が得られます。(18)式を導くに際して，式の両辺を，何度も二乗する必要があります。従って，m, M, k, K についての吟味が必要です。今

$$S \equiv \frac{M}{m} \quad , \quad t \equiv \frac{K}{k} \tag{19}$$

を導入しますと，下図のⅢの範囲で，界面に局在した振動状態が可能です。

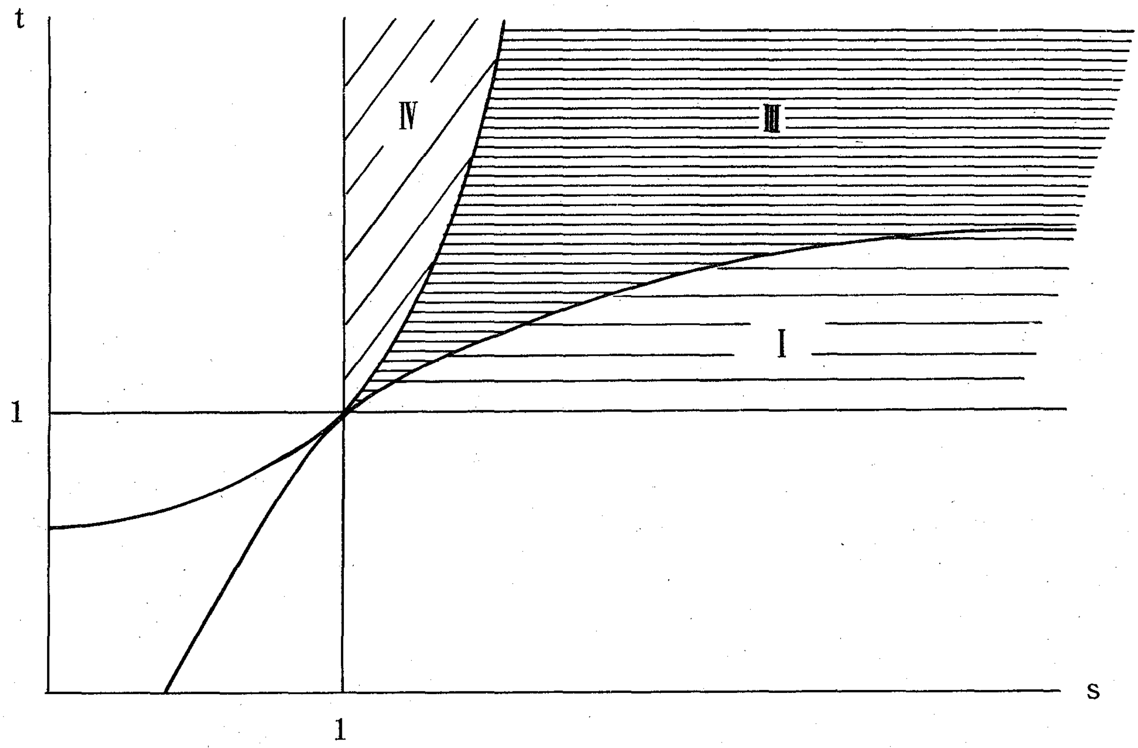
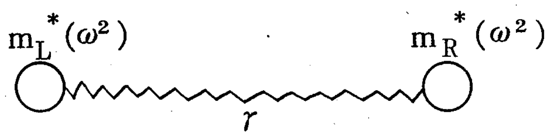


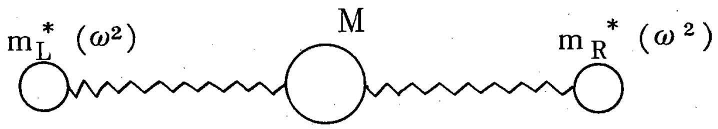
図 2

この振動状態は，(18)式から，$m=M$あるいは，$k=K$の場合には存在しません。両方の系を構成する原子が違う時には，ある条件下で必ず存在すると言えます。もっとも，ここで考えているのは，最近接相互作用の場合ですから，forceが long rangeの場合には，様子が異なると思われます。ここで得たGreen fn.を用いての公式自体の変更が必要となりましょう。

次に，最近接相互作用に話を限りますと，L及びRの系は，それぞれ仮想的な質量$m_L^*(\omega^2)$と$m_R^*(\omega^2)$を持った atomと見做すことが可能で，m_L^*とm_R^*とがバネ定数γで結ばれていると考えることが出来ます。(局在した振動状態についての話です。)従って，界面を持った系の界面状態は，下図のように，二つの atomsの固有振動を計算する事と等価となります。



この場合，界面に不純物原子Mが入った場合にも，三原子系として取り扱い可能です。



以上で，Garcia–Moliner と Rubisが用いた方法は，簡単に，equivalent pot.の方法を用いずとも得る事が可能であり，そして，同じ形が最近接相互作用を持つ格子系に対して，等しく成り立つ事を見ました。一次元の格子系に用いると，実際，ある条件下で，界面に局在振動が存在する事を知りました。

1) J.Hori, M.Ono, M.Ogura and K.Wada: Proceedings of the International Conference, Rennes, France, 1971, p.400

2) F.Garcia–Moliner and J.Rubio: J. Phys. C. 2(1969) p.1789